

УДК 681.1

А.А. Помилуйко, студент гр. ПА-91мп, Володарський В.А., студент гр. ПА-91мп
КПІ ім. Ігоря Сікорського

МЕТОДИ ПОБУДОВИ ГРАДУЮВАЛЬНОЇ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Анотація. В статті представлені матеріали щодо переваги вибору методу найменших квадратів при побудові градувальної характеристики.

Ключові слова: метод найменших квадратів, градувальна характеристика, лінійна залежність.

ВСТУП

При проведенні аналітичних досліджень необхідно будувати градувальну характеристику [1]. Однак, експериментальні дані, які використовуються для побудови характеристики, під впливом випадкових величин мають розсіювання. Використання статистичних методів дозволяє визначити найбільш правдоподібне положення прямої, що відповідає наявним даним.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Мета статті – показати переваги вибору методу найменших квадратів при побудові градувальної характеристики.

ОСНОВНА ЧАСТИНА

Суть методу найменших квадратів (МНК) полягає у тому, що набір даних, що являється експериментальним, найкращим чином описує саме та пряма, для котрої сума квадратів відхилень експериментальних значень від розрахованих є мінімальною.

Для побудови градувальної характеристики потрібно вибрати вид залежності. Оскільки на практиці найчастіше зводять градування до знаходження лінійної залежності, то можна прийняти такий вид залежності за основу. Таким чином, можна вважати, що величини X та Y – лінійно зв'язані. Така залежність може бути представлена як:

$$Y = a + bX . \quad (1)$$

Допускають, що вхідна величина X визначається з малою похибкою, а похибкою вимірювання вихідної величини не можна знехтувати. Тоді маємо:

$$Y_i = a + bX_i + \varepsilon_i \quad (2)$$

де a – це відрізок, що відсікається на осі ординат, b – це кутовий коефіцієнт градувальної характеристики, ε_i - випадкова похибка.

Також слід брати до уваги таку проблему, як грубі промахи. Цей фактор може впливати на точність результатів вимірювань. Це обумовлює виборі методу побудови градувальної характеристики.

Метод найменших квадратів (МНК) є широко розповсюдженим методом при виборі побудови градувальної характеристики. [2] Оцінки параметрів a і b в такому методі розраховують з умови мінімуму суми квадратів вертикальних відрізків, що являються відстанями від експериментальних точок до шуканої прямої. Головними передумовами для МНК є те, що дані відповідають

нормальному закону розподілу, а вхідні величини є незалежними. Вирази для оцінки параметрів a і b будуть:

$$a = \frac{(\sum Y_i - b \sum X_i)}{m} \quad (3)$$

$$b = \frac{m \sum X_i Y_i - \sum X_i \sum Y_i}{m \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2} \quad (4)$$

Як вже відмічалось, застосування даного методу є цілком доцільним при малих похибках визначення величини X_i та нормальному розподілу похибки вимірювання вихідної величини Y .

У якості альтернативного підходу, можна розглядати метод “найглибшої” регресії. Такий метод представляє собою пошук класу прямих, які при обертанні навколо середнього покривають якнайбільш максимальну кількість експериментальних точок. Якщо така умова виконується, то вибирається така пряма, яка мінімізує максимальне відхилення експериментальних даних від прямої. Основною перевагою даного методу є стійкість до грубих промахів. На жаль, появу грубих промахів при проведенні кількісного аналізу не можна ігнорувати. Однак, після відкидання таких промахів є можливість використання усіх переваг МНК, але з меншою статистичною надійністю.

Властивості оцінок МНК [3]:

- Незміщенність оцінок параметрів, тобто математичне сподівання оцінок рівняється істинній величині параметрів;
- Ефективність оцінок МНК, тобто мають мінімальну дисперсію;
- Оцінки параметрів розподілені за нормальним законом;

Перш за все, необхідно визначити можливу кількість грубих промахів, або таку кількість промахів, яка може з'явитися при виконання градуювання. Взагалі, загальне число вимірювань m для даного методу майже ніколи не перевищує 12 (часто мають 4-5 градуювальних зразків). Тому можна стверджувати той факт, що ймовірність появи великої кількості промахів мала.

Дійсно, при налагодженій процедурі вимірювань ймовірність грубого промаху для одиничного вимірювання не перевищує 0,02 (це оцінка зверху; насправді ця величина зазвичай менше). При цьому ймовірність появи одного грубого промаху під час градуювання в цілому менше 0,22, а двох - менше 0,05. Іншими словами, ймовірністю появи двох грубих промахів відразу в ході градуювання можна знехтувати.

Для виявлення грубих промахів при регресійному аналізі найчастіше використовуються методи, засновані на аналізі залишків [4]

$$e_i = Y_i - \hat{Y}_i \quad (5)$$

де \hat{Y}_i - точки на знайдений прямій, відповідні X_i . Коректно розраховувати «студентизовані» залишки

$$r_i = \frac{e_i}{[S_{Y/X} (1-h_i)^{1/2}]} \quad (6)$$

де $s_{Y/X}$ - стандартне відхилення залишків e_i та

$$h_i = 1/m + \frac{(X_i - \bar{X})^2}{(m-1)s_X^2}, \quad s_X^2 = \sum (X_i - \bar{X})^2 / m - 1 \quad (7)$$

До величин r_i можна застосувати всі методи виявлення грубих помилок, розроблені для нормально розподілених сукупностей. Іншим способом є використання відстані Кука d_i , статистики, яка показує ступінь зміни коефіцієнтів рівняння регресії при виключенні окремої точки

$$d_i = \frac{e_i^2 h_i}{s_{Y/X}^2 (1-h_i)^2} \quad (8)$$

Величини d_i завжди більше нуля і в нормі не перевищують. Якщо d_i приймає значення більше 1, то відповідну величину розглядають як грубий промах. Після відкидання грубого промаху (якщо він був достовірно виявлений) ніщо не заважає застосовувати МНК для знаходження оцінок a и b .

Слід пам'ятати, що метод найменших квадратів справджується тільки для лінійних рівнянь, або для таких рівнянь, що припускають можливість їх лінеаризації.

ВИСНОВКИ

Показано, що для оцінки коефіцієнтів градувальної характеристики при кількісному аналізі доцільно використовувати метод найменших квадратів (МНК) після виключення грубих промахів. Однак слід пам'ятати, що потрібно перевіряти виконання основних положень для кожної методики.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] Методичні рекомендації «Статистика в кількісному аналізі»: / уклад. Т.І. Ахметова: КНІТУ, 2013. — 16-20 с.
- [2] Математична статистика та обробка геологічних даних, - Режим доступу: http://www.geol.univ.kiev.ua/lib/zhukov_n_n/MC_5-6.pdf
- [3] Лінійний метод найменших квадратів - Режим доступу: <http://chemistry.univer.kharkov.ua/files/lin-mnk.pdf>
- [4] Градувальні характеристики ЗВТ. / СПб. ВНИИМ - Режим доступу: <https://files.stroyinf.ru/Data2/1/4293768/4293768858.pdf> - 1997р.

Наук. Керівник – д. т. н., проф. Володарський Є.Т.